

# Компьютерный дизайн структуры нанокристаллического состояния, модельные расчеты зонной структуры и термоэлектрических свойств теллурида меди в качестве перспективных материалов для квантовых сенсоров

Курбангулов Азат Рифкатович

Цыганкова Ляйсан Валиуллиновна, Биккулова Алсу Валиуллиновна, Абдулгафаров Рамазан Рустамович

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета

Биккулова Нурия Нагимьяновна, д.ф.-м.н., Акманова Гузель Рифкатовна, к.ф.-м.н.

azatkurbanstr@mail.ru

Были проведены модельные компьютерные расчеты фазовой диаграммы системы Cu–Te с помощью программы USPEX [1], уточнены структуры теллуридов меди стехиометрических и нестехиометрических составов. В алгоритме USPEX используется теория функционала плотности, ее основная цель заключается в упрощении расчетов электронной структуры молекул и кристаллов. Поиск таких структур в системе Cu–Te показал, что при абсолютном нуле и давлении 0.1 ГПа стабильными являются составы Cu<sub>7</sub>Te<sub>5</sub>, Cu<sub>3</sub>Te<sub>2</sub>, Cu<sub>5</sub>Te<sub>4</sub> и Cu<sub>7</sub>Te<sub>4</sub>. Экспериментальная фазовая диаграмма при нормальных условиях содержит фазы этих составов.

Структуры и параметры стабильных фаз, полученные при расчете, представлены в таблице:

№	Формула	Параметры ячейки					
		<i>a</i> , Å	<i>b</i> , Å	<i>c</i> , Å	$\alpha$ , °	$\beta$ , °	$\gamma$ , °
1	Cu <sub>1,4</sub> Te	3.98000	3.98000	6.12000	90.0000	90.0000	90.0000
2	Cu <sub>3</sub> Te <sub>2</sub>	3.86605	4.47305	7.09674	76.5671	75.7852	64.5499
3	Cu <sub>5</sub> Te <sub>4</sub>	7.29166	4.00469	7.40392	90.0000	112.9008	90.0000
4	Cu <sub>7</sub> Te <sub>4</sub>	8.59486	7.31671	4.23495	89.8054	85.7704	88.5299

Полученные результаты можно использовать для моделирования эволюции кристаллической структуры с повышением температуры. Для уточнения стабильности теоретически полученных фаз рассчитаны зонная структура и фоновые спектры (рис. 1, 2).

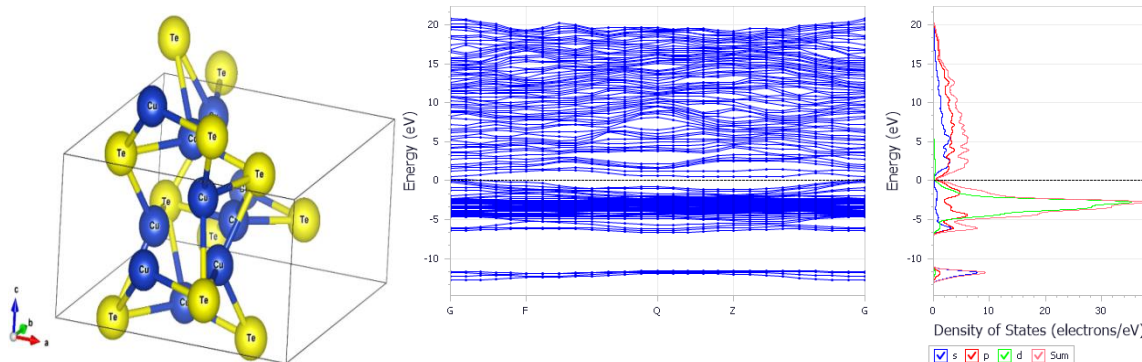


рис. 1. Кристаллическая и зонная структура Cu<sub>7</sub>Te<sub>4</sub>

Расчет зонной структуры и фононного спектра теллуридов меди был выполнен в рамках теории функционала электронной плотности с помощью метода псевдопотенциала в базисе плоских волн, реализованный в программном пакете Quantum Espresso [2]. При расчете были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы для меди, для теллурида псевдопотенциалы сохраняющие норму, которые сгенерированы данной программой. Энергия обрезки плоских волн имела величину 85–100 Ry. Использовался автоматический выбор точек обратной решетки (k-точек) при помощи метода Монкхорста-Пака на сетке 8×8×8.

Теоретические расчеты предсказывают нестабильность фаз из-за наличия мнимых фононных частот на границе зоны Бриллюэна. В то время как, фононная дисперсия фаз стабильна во всей зоне Бриллюэна. Область вокруг точки G в структуре фононного спектра фаз показывает мнимые частоты (изображенные как отрицательные). Это указывает на динамическую нестабильность систем и предполагает, что при смещении ионов в соответствии с волновым вектором в точке G, в системе не возникает возвращающей силы, которая приводит систему в положение равновесия, также смещение ведет к снижению полной энергии. При комнатной температуре предсказанные структуры существуют и являются ионными проводниками. Для этих соединений характерен анизотропный характер колебаний и, по-видимому, гармоническое приближение, используемое при расчетах, приводит к появлению отрицательных частот в фононном спектре. Этот факт можно использовать как один из возможных критериев для оценки и предсказания наличия ионной проводимости в соединениях.

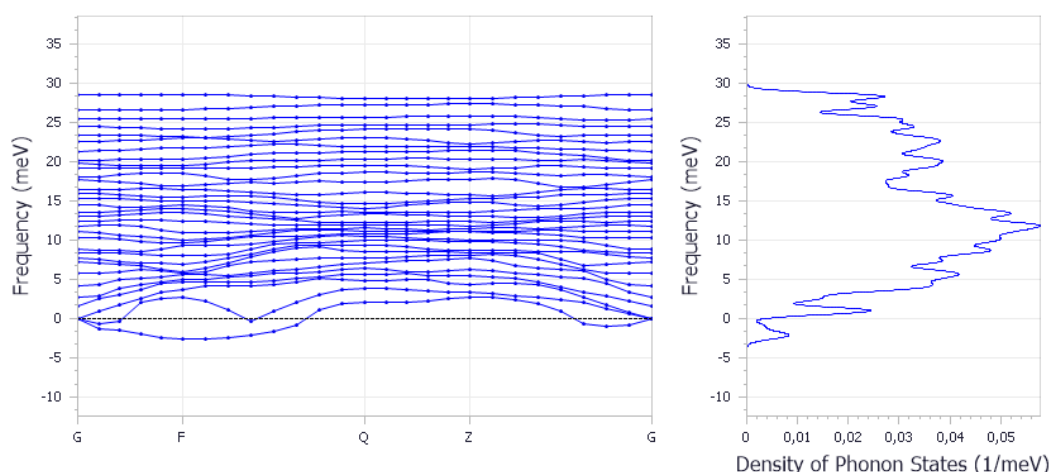


рис. 2. Фононный спектр  $\text{Cu}_7\text{Te}_4$

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-80007.

Список публикаций:

[1] USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography) [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <https://uspeh-team.org>.

[2] Quantum-ESPRESSO [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.quantum-espresso.org>.

## Расчет фононного спектра халькогенидов меди и серебра

**Курбангулов Азат Рифкатович**

**Цыганкова Ляйсан Валиуловна, Сафаргалиев Данир Ильдарович**

**Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета**

**Биккулова Нурия Нагимьяновна, д.ф.-м.н.**

[azatkurbanstr@mail.ru](mailto:azatkurbanstr@mail.ru)

В данной работе приводятся результаты исследований методом неупругого рассеяния нейтронов халькогенидов меди и серебра при температуре 300 К в несуперионной фазе. Для изучения динамики решетки суперионных проводников эффективным является метод неупругого рассеяния медленных нейтронов. Получены динамические структурные факторы и обобщенные плотности фононных состояний данных соединений.

Обработка экспериментальных данных проводилась с использованием стандартных программ обработки нейтронных спектров. Для каждого из спектров вычислялся спектр частот  $G(\varepsilon)$  по формуле (1) для дважды-дифференциального сечения однофононного некогерентного рассеяния нейтронов:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{\sigma}{4\pi} \sqrt{E/E_0} e^{-2W} \frac{\hbar^2 Q}{2M} \frac{G(\varepsilon)}{\varepsilon(1 - e^{-\varepsilon/kT})}, \quad (1)$$

где  $Q$  – передача импульса нейтрона,  $e^{-2W}$  – фактор Дебая-Уоллера,  $M$  – масса ядра.

Для улучшения статистической точности спектры суммировались по нескольким углам рассеяния для каждой группы детекторов.

Важность низкоэнергетических мод, которые дают основной вклад в тепловое движение из-за высокой плотности состояний и низкой энергии активации, является общепризнанным [1–4].

Получены обобщенные плотности фононных состояний  $\text{Cu}_2\text{Te}$ ,  $\text{Cu}_2\text{S}$  и  $\text{Ag}_2\text{Te}$  (рис. 1). Фононные спектры исследованных соединений имеют особенности, характерные для структурно-разупорядоченных соединений.

Плотности фононных состояний  $G(\varepsilon)$  для исследованных халькогенидов характеризуются недебаевским поведением в области малых энергий и выраженными максимумами при комнатной температуре с энергией